

TEORIA E TECNICHE COMPUTAZIONALI PER LA FISICA BIOLOGICA

Dr. Velia Minicozzi

1) RICHIAMI DI MECCANICA STATISTICA

La nozione di *ensemble*: *ensemble* micro-canonico canonico e gran-canonico. Equivalenza tra *ensembles*. Il teorema di equipartizione dell'energia. Potenziali chimici. Il Metodo della Massima Entropia.

2) LA DINAMICA MOLECOLARE CLASSICA

Discretizzazione delle equazioni di Hamilton-Jacobi. Operatore di evoluzione temporale di Liouville. La dinamica molecolare come trasformazione canonica. Multiple-Time-Step. Metodo sistolico e metodo della lista.

3) METODI STOCASTICI PER IL CALCOLO DELLA FUNZIONE DI PARTIZIONE

Il metodo Monte Carlo. Catene di Markov, principio del bilancio dettagliato, teorema di Markov, algoritmo di Metropolis. Monte Carlo ibrido. Moto Browniano ed equazione di Langevin. Equazione di Fokker-Planck, soluzione asintotica dell'equazione di Fokker-Planck.

4) SISTEMI FERMIONICI IN FISICA DELLA MATERIA

L'approssimazione di Born-Oppenheimer. Il modello di Thomas-Fermi. L'approssimazione di Hartree-Fock. Simulazioni *ab initio*: la teoria del funzionale densità. Il metodo di Car-Parrinello.

5) APPLICAZIONI ALLE BIOMOLECOLE

Introduzione al modelling di biomolecole. Force-fields empirici: all atoms e coarse grained (Martini). Algoritmi velocity-Verlet e leap-frog. Reversibilità temporale. Algoritmi di minimizzazione dell'energia. Simulazioni negli *ensembles* NVT and NPT. Somme di Ewald. Funzioni di correlazione e loro calcolo in dinamica molecolare. Coefficiente di diffusione.

6) TECNICHE DI PROGRAMMAZIONE SU PIATTAFORME PARALLELE

Struttura dei codici per la dinamica molecolare di biomolecole. Programmazione ad agenti.